P3D
MANUAL DE USUARIO

2015
Todos los Derechos Reservados
Universidad Distrital Francisco José de Caldas
GICOGE - BIOINFUD

CONTENIDO

- DESCRIPCIÓN
- PRERREQUISITOS
- GUÍA DE USO
  - Inicio de la aplicación
  - Pantalla de inicio
    - Formulario de búsqueda
    - Historial de estructuras
  - Pantalla de Visualización
    - Lienzo de estructura
      - Mover la estructura
      - Girar la estructura
      - Acerca la estructura
      - Alejar la estructura
    - Publicación
    - Secuencia
    - Estructura secundaria
- LICENCIA

DESCRIPCIÓN

P3D es una aplicacion para dispositivos móviles Android que facilita la visualización de estructuras de proteínas en tres dimensiones. Ésta app le ofrece la posibilidad al usuario de encontrar información relevante sobre la estructura, tales como: la secuencia, su estructura secundaria y su publicación en PubMed Central.

PRERREQUISITOS

Para poder ejecutar y utilizar la aplicación movil, se deben cumplir los siguientes prerrequisitos:

- Instalación completa del software en un dispositivo movil (**Android 5.0** o superior).
- Conexión a internet

GUÍA DE USO

Inicio de la aplicación

Primero se debe abrir la aplicacion y esperar a que cargue completamente. Una vez termine de cargar, se desplegará la pantalla de inicio como se muestra en la figura 1.

Figura 1. Pantalla de inicio.

Pantalla de inicio

En esta pantalla se encuentran 2 componentes principales: el primero es el formulario de búsqueda y el segundo es el historial de estructuras buscadas (Ver figura 2).

Figura 2. Elementos principales de la pantalla de inicio.

Formulario de búsqueda

Este componente está formado por un cuadro de texto, ejemplos y un boton. En el cuadro de texto se de debe introducir el “id” de la estructura que se desea graficar (Ver figura 3) y este valor debe coincidir con el nombre asignado por Research Collaboratory for Structural Bioinformatics (RCSB) en la Protein Data Bank (PDB)[1]. Despues de introducir el nombre de la estructura se debe oprimir el boton llamado “Graph” y esto desplegará la pantalla de visualización, siempre y cuando la estructura exista, de lo contrario, se desplegará un mensaje de error.

[1] http://www.rcsb.org/

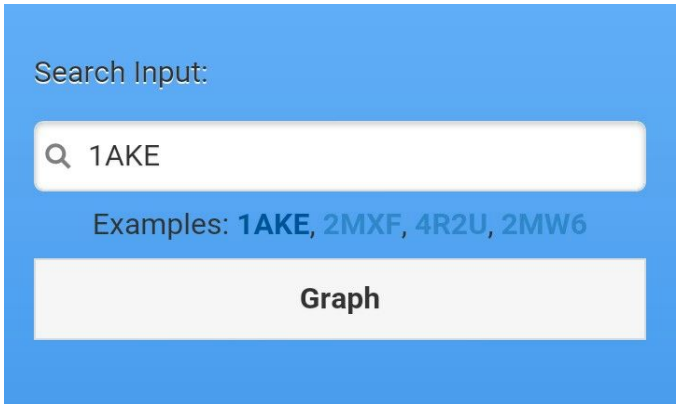

Figura 3. Formulario de búsqueda.

Si se desea utilizar alguno de los ejemplos, se debe oprimir el nombre del ejemplo (esto actualizará el cuadro de búsqueda) y luego oprimir el botón llamado “Graph” (Ver figura 4).

Figura 4. Utilizar un ejemplo.

Historial de estructuras

Este componente sirve para ver una lista de las últimas 10 estructuras que se han buscado. Para acceder a esta lista se debe oprimir el boton llamado “History” que se encuentra en la parte superior derecha de la pantalla (Ver figura 5).

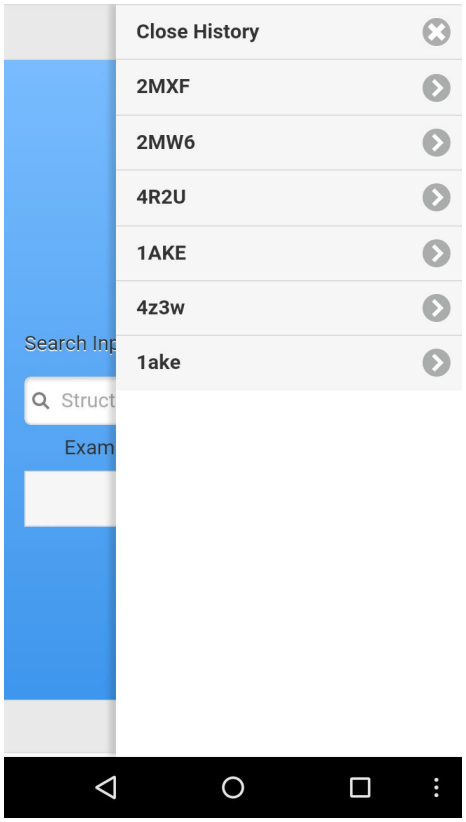

Figura 5. Aspecto del historial de estructuras.

Si se desea graficar alguna de las estructuras del historial, se debe oprimir el nombre en la lista (esto actualizará el cuadro de búsqueda) y luego oprimir el botón llamado “Graph”.

Pantalla de Visualización

En esta pantalla se encuentran 4 componentes principales: el primero es el lienzo donde se grafica la estructura deseada, el segundo es boton de de publicación, el tercero es el boton de secuencia y el cuarto es el boton de la estructura secundaria (Ver figura 6).

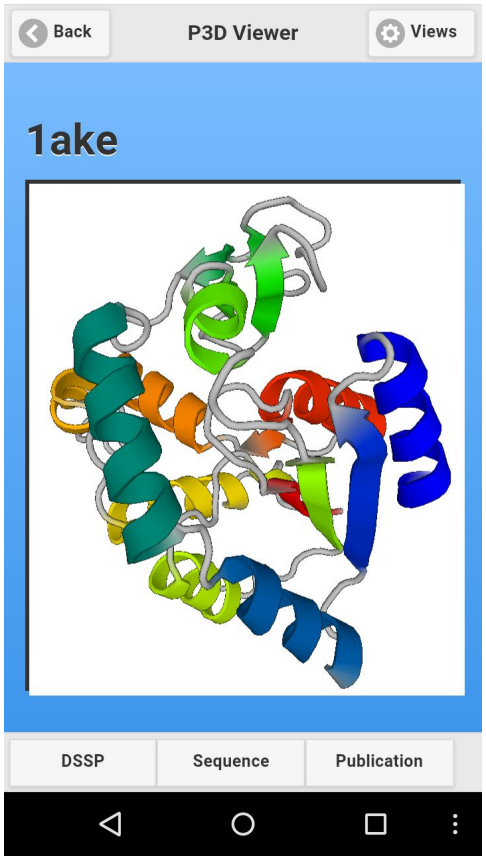

Figura 6. Aspecto de la pantalla de visualización.

Lienzo de estructura

Este lienzo contiene la estructura graficada en tres dimensiones y es posible interactuar con este elemento para ver la estructura desde diferentes puntos de vista.

Mover la estructura

Para mover la estructura se debe tocar con dos dedos en alguna parte de la imagen y arrastrarlos hacia el lugar que desea mover, como se muestra en la figura 7.

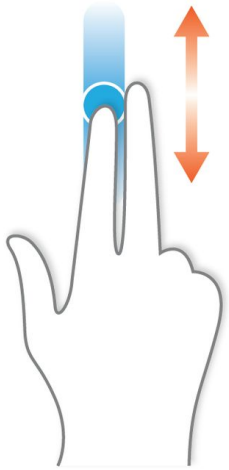

Figura 7. Gesto para mover la estructura.

Girar la estructura

Para girar la estructura se debe tocar en alguna parte de la estructura y arrastrar el dedo hacia el lugar que se desea girar, como se muestra en la figura 8.

Figura 8. Gesto para girar la estructura.

Acerca la estructura

Para acercar la estructura se debe hacer un gesto llamado “Zoom”, como se muestra en la figura 9.

Figura 9. Gesto para acercar la estructura.

Alejar la estructura

Para alejarla estructura se debe hacer un gesto llamado “Pinch” o “Pellizcar”, como se muestra en la figura 10.

Figura 10. Gesto para alejar la estructura.

Publicación

Figura 11. Boton de la publicación.

Al oprimir el boton llamado “Publication” (Ver figura 11) se desplegará una pantalla donde se podrá ver un resumen del artículo de PubMed Central (PMC) asociado a la estructura, como se muestra en la figura 12. Si el artículo se encuentra en proceso de publicación entonces no se podrá desplegar por la aplicación debido a que los artículos sin publicar no poseen un ID en PMC.

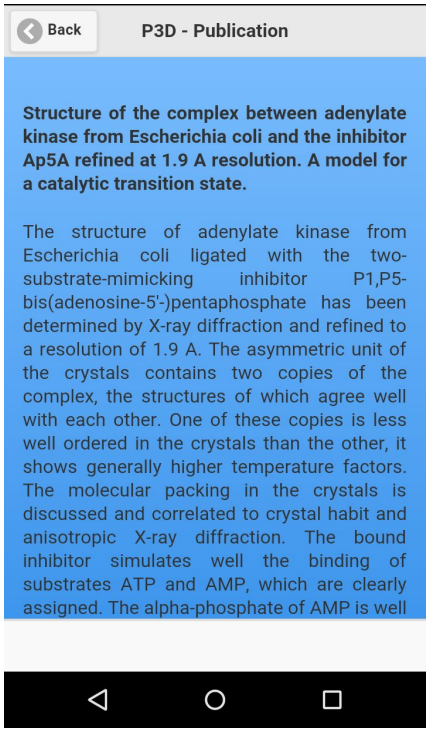
Back
P3D - Publication
Structure of the complex between adenylate kinase from Escherichia coli and the inhibitor Ap5A refined at 1.9 A resolution. A model for a catalytic transition state.
The structure of adenylate kinase from Escherichia coli ligated with the two-substrate-mimicking inhibitor P1,P5-bis(adenosine-5'-)pentaphosphate has been determined by X-ray diffraction and refined to a resolution of 1.9 A. The asymmetric unit of the crystals contains two copies of the complex, the structures of which agree well with each other. One of these copies is less well ordered in the crystals than the other, it shows generally higher temperature factors. The molecular packing in the crystals is discussed and correlated to crystal habit and anisotropic X-ray diffraction. The bound inhibitor simulates well the binding of substrates ATP and AMP, which are clearly assigned. The alpha-phosphate of AMP is well

Figura 12. Aspecto del resumen de la publicación.

Secuencia

Figura 13. Boton de secuencia.

Al oprimir el boton llamado “Sequence” (Ver figura 13) se desplegará una pantalla donde se podrá ver la secuencia de la estructura de la proteína. Esta secuencia se puede ver en 4 formatos diferentes: FASTA, CODATA, PRIDE y RAW. El formato predeterminado en el que se despliega la secuencia es CODATA. Para cambiar el formato se debe oprimir en el nombre del formato actual y seleccionar el formato deseado.

Back
Sequence
Format:
CODATA
5 10 15
1 M R I I L L G A P G A G K G T Q A Q
19 F I M E K Y G I P Q I S T G D M L R
37 A A V K S G S E L G K Q A K D I M D
55 A G K L V T D E L V I A L V K E R I
73 A Q E D C R N G F L L D G F P R T I
91 P Q A D A M K E A G I N V D Y V L E
109 F D V P D E L I V D R I V G R R V H
127 A P S G R V Y H V K F N P P K V E G
145 K D D V T G E E L T T R K D D Q E E
163 T V R K R L V E Y H Q M T A P L I G
181 Y Y S K E A E A G N T K Y A K V D G
199 T K P V A E V R A D L E K I L G

Figura 14. Aspecto de la secuencia de la estructura.

Estructura secundaria

Figura 15. Boton de estructura secundaria.

Al oprimir el boton llamado “DSSP” (Ver figura 15) se desplegará una pantalla donde se podrá ver una imagen que muestra la secuencia junto con la estructura secundaria como se muestra en la figura 16.

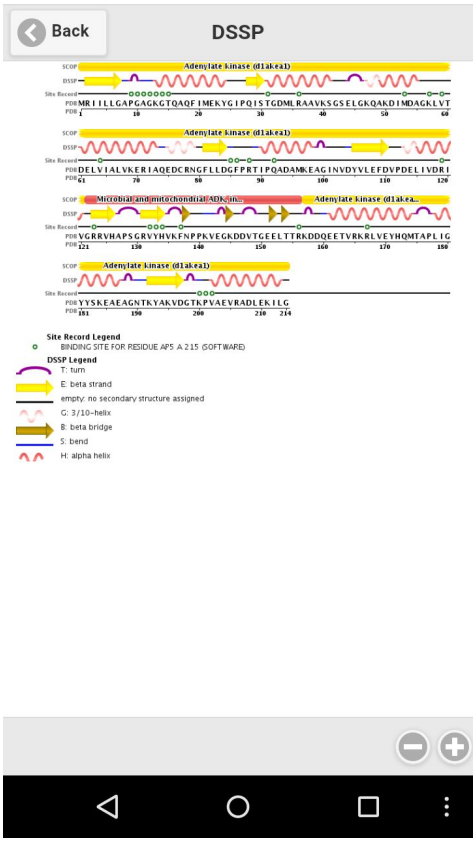

Figura 16. Aspecto de la estructura secundaria.

LICENCIA

Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-CompartirIgual 4.0 Internacional.